计算数学丛书

蒙特卡罗方法

徐钟济　编著

上海科学技术出版社

计算数学丛书

蒙特卡罗方法

徐钟济 编著

上海科学技术出版社

内 容 简 介

本书叙述了蒙特卡罗(Monte Carlo)方法的基本原理、主要特点以及在某些领域中的应用．全书共分十三章，前六章是 Monte Carlo 方法的基础部分，后七章是 Monte Carlo 方法的应用部分．

本书可供科学工作者及大专院校师生参考．

计算数学丛书

蒙 特 卡 罗 方 法

徐钟济　编著

上海科学技术出版社出版

（上海瑞金二路 450 号）

新华书店上海发行所发行　丹阳人民印刷厂印刷

开本787×1092　1/32　印张10.5　字数229,000

1985年 6 月第 1 版　1985年 6 月第 1 次印刷

印数：1—8,400

统一书号：13119·1221　　定价：2.15元

出 版 说 明

《计算数学丛书》是为了适应计算数学和计算机科学的发展，配合高等院校计算数学教学的需要而组织的一套参考读物。读者对象主要是高等院校数学系和计算机科学系的学生、研究生，亦可供高等院校数学系和计算机科学系的教师以及工矿企业、科研单位从事计算工作的技术人员参考。

本丛书向读者介绍近代计算方法的一些主要进展及其适用范围和实用效果。每种书集中介绍一个专题，针对本专题的近代发展作综合性的介绍，内容简明扼要，重点突出，有分析，有评价，力图使读者对该专题的动向和发展趋势得到一个完整的了解。

本丛书已拟定的选题计有：《线性代数与多项式的快速算法》、《数论变换》、《数值有理逼近》、《矩阵特征值问题》、《索伯列夫空间引论》、《计算组合数学》、《样条与插值》、《有限条形法》、《广义逆矩阵及其计算方法》、《非线性方程迭代解法》、《奇异摄动中的边界层校正法》、《沃尔什函数理论与应用》、《多项式最佳逼近的实现》、《坏条件常微分方程数值解》、《误差分析》、《最小二乘问题的数值解法》、《板壳问题非协调方法》、《外推法及其应用》、《Monte Carlo 方法》、《差分格式理论》、《高维偏微分方程数值解》等二十余种，于一九八〇年初起陆续出版。

序　言

Monte Carlo 方法是一种具有独特风格的数值计算方法，它既能求解确定性的数学问题，也能求解随机性的问题．从 Monte Carlo 方法诞生至今已有三十多年的历史，随着科学技术发展的需要以及电子计算机的不断进步，使得 Monte Carlo 方法在计算数学中的地位越来越重要了．

本书的目的在于对 Monte Carlo 方法进行全面的介绍．全书共分十三章，前六章是 Monte Carlo 方法的基础部分，其中包括：Monte Carlo 方法基础；伪随机数的产生；伪随机数的检验；随机变量抽样；确定性问题求解；积分计算与降低方差技巧等．主要是编者过去分别在安徽大学数学力学系、第一届全国概率论学术交流会、北京市数学会、中国科学院数学研究所运筹室等单位所作报告的总结．后七章是 Monte Carlo 方法的应用部分，其中包括：在屏蔽计算中的应用；在核临界安全计算中的应用；在随机服务系统中的应用；在信号检测中的应用；在系统模拟中的应用；在稀薄气体绕流计算中的应用；在可靠性试验计算中的应用．

本书是为广大范围读者而编写的，除了第 7, 8, 10, 12 章是为那些熟悉中子物理、无线电工程和空气动力学的读者而设计的外，要了解本书的大部分材料，读者仅需具有大学数学分析教材的数学知识以及概率论和统计推断方面的基础知识就已足够．

本书可作为计算数学工作者和从事科学计算的科技工作者参考．编者希望这本参考书能对那些研究 Monte Carlo 方

法及其应用的同志有所裨益，而且能让读者了解 Monte Carlo 方法在解各种不同问题中的效用.

在本书的编写过程中，编者得到了许多同志的支持和帮助，特别是沈士博、魏公毅、徐光辉、吴新瞻、李夙林等同志，裴鹿成同志两次审校了全稿，提出了许多宝贵意见，在此一并表示感谢. 由于时间仓促，本书一定存在许多缺点和错误，衷心希望读者提出宝贵意见.

徐钟济
于中国科学院计算技术研究所

目　　录

第 1 章

Monte Carlo 方法基础

§1 引　　言

Monte Carlo 方法的定名[1~4]和系统发展约始于二十世纪四十年代中. 但如果从方法特征的角度来说（尽管在当时方法雏型的出现是孤立的而且也没有得到发展），可以一直追溯到十九世纪后半叶的蒲丰(Buffon)随机投针试验, 即著名的所谓蒲丰问题.

蒲丰是法国的著名学者, 对概率论在博弈游戏中的应用深感兴趣, 于 1777 年发现了随机投针的概率与 π 之间的关系（蒲丰的“或然性算术尝试”——Essai d'Arithmatique moral 虽然发表于 1777 年, 但据说在 1760 年已经写成）, 提供了早

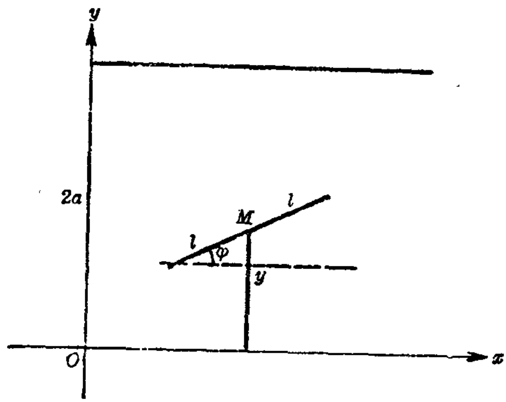

图 1.1

期学者们用随机试验求 π 值的范例.

在平面上画有相互距离均为 $2a$ 的平行线束,向平面上随机投一枚长为 $2l$ 的针,为了避免针与两平行线同时相交的复杂情况,假定 $0>l>0$. 设 M 为针的中点,y 为 M 与最近平行线的距离,φ 为针与平行线的交角(如图 1.1),$0\leqslant y\leqslant a$, $0\leqslant\varphi\leqslant\pi$. 于是,很明显,

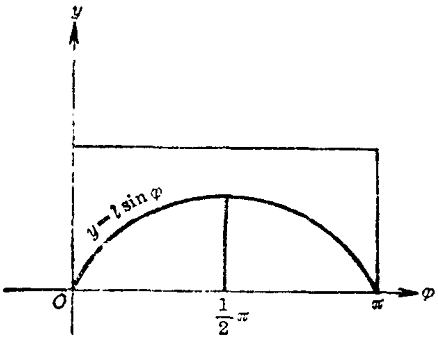

图 1.2

针与平行线相交的充要条件是 $y\leqslant l\sin\varphi$(如图 1.2),故相交的概率为

$$p=\frac{1}{\pi a}\int_0^\pi d\varphi\int_0^{l\sin\varphi}dy=\frac{1}{\pi a}\int_0^\pi l\sin\varphi\,d\varphi=\frac{2l}{\pi a}.$$

用 N 表示投针次数,ν 表示其中针与平行线相交次数,由贝努里(Bernoulli)定理[6]知,当 N 充分大时,频率接近于概率,即 $\nu/N\approx 2l/\pi a$, 于是有

$$\pi\approx\frac{2lN}{a\nu}, \tag{1.1}$$

这就是上面所说的用随机试验求 π 值的基本公式.

根据公式(1.1),19~20 世纪,曾有不少学者做了随机投针试验,并得到了 π 的估计值. 其中最详细的有如下两个[6,52,53]

试 验 者	a	l	投针次数 N	相交次数 ν	π 估计值
Wolf (1853)	45	36	5000	2532	3.1596
Lazzarini (1911)	3	2.5	3408	1808	3.1415929

其中的π估计值就是利用π的近似公式(1.1)得到的，即

$$\pi \approx \frac{2\times 36\times 5000}{45\times 2532}=\frac{2000}{633}\approx 3.1596,$$

$$\pi \approx \frac{2\times 2.5\times 3408}{3\times 1808}=\frac{355}{113}\approx 3.1415929.$$

一般情况下，随机抽样试验的精度是不高的，Wolf 的试验结果是$\pi\approx 3.1596$，只准确两位有效数字．裴鹿成、张孝泽[22]试验了几十万次，$\pi\approx 3.14$，只准确三位有效数字．精度是由方差$\sigma^2(\nu/N)=p(1-p)/N$决定的，为了确定概率p，不妨取$l=a$这一极限情况，这时$p=2/\pi\approx 0.6366$，$\sigma^2(\nu/N)\approx 0.2313/N$，由德·莫弗 (De Moivre) -拉普拉斯 (Laplace) 定理[6]，当$N\to\infty$时，有

$$\lim_{N\to\infty} p\left\{\frac{\left|\frac{\nu}{N}-p\right|}{\sqrt{\frac{p(1-p)}{N}}}\leqslant\lambda\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\lambda}^{\lambda} e^{-\frac{1}{2}x^2}\,dx,$$

即频率近似地服从正态分布律$N(\nu/N,\ p(1-p)/N)$，如果要求以 95% 的概率，保证以频率作为p的近似值精确到三位有效数字，$\varepsilon=|\nu/N-p|/p\leqslant 0.001$，根据上式，要求试验次数$N\geqslant 1.96^2\times 0.231/0.001^2\approx 88.7$万次，这和裴鹿成、张孝泽的试验结果是一致的．

至于 Lazzarini 的试验，为什么试验次数少反而精确度却很高呢？这是由于这一试验结果恰好和祖冲之密率 355/113(见«隋书律历志»)相合，而祖冲之密率为无理数π的连分式，属于π的最佳有理逼近．很明显，作为一种具有随机性质的试验，其结果恰好与最佳有理逼近的结果一致是非常非常

偶然的，因此，Lazzarini 的试验结果是不大可信的（在该试验中，若针与平行线相交次数多一次，则 π 的估计值的有效位数就只有两位了）.

进入本世纪四十年代中，由于电子计算机的出现，利用电子计算机可以实现大量的随机抽样试验，使得用随机试验方法解决实际问题才有了可能. 作为当时的代表工作便是在第二次世界大战期间对原子弹研制工作中的应用. 这一研究工作涉及到对中子随机扩散进行直接模拟，即在电子计算机上对中子的行为进行随机抽样模拟，通过对大量中子行为的观察推断出所要求的参数.当然，即使是在这些研究工作的早期，Metropolis、Ulam、Von Neumann 等人[1~5]并不是对中子行为进行完全的直接模拟，而采用了某些降低方差的技巧，具体地说是利用了"重要性抽样"，"俄罗斯轮盘(Russian Roulette)和分裂(Splitting)方法"[11]，但是，毕竟还是在中子行为直接模拟基础上采用的. 对这种所谓粒子输运问题的早期工作一直延续至五十年代初的 Harris 和 Kahn 等人[12,13].

从上面列举的有关 Monte Carlo 方法的雏型和实际应用的两个例子中可以察觉到，它包括有，以概率统计理论为其主要理论基础，以随机抽样(随机变量的抽样)为其主要手段的这样两个核心问题. 为了揭示 Monte Carlo 方法的特征，于此简要叙述如下几个问题：

1. Monte Carlo 方法的基本思想.
2. Monte Carlo 方法的收敛性和基本特点.
3. 随机数与伪随机数.
4. 随机变量的抽样.
5. 一个简单例子.
6. Monte Carlo 方法的发展历史.

§2 Monte Carlo 方法的基本思想

Monte Carlo 方法亦称为随机模拟(Random simulation)方法，有时也称作随机抽样(Random sampling)技术或统计试验(Statistical testing)方法[7,8]. 它的基本思想是，为了求解数学、物理、工程技术以及生产管理等方面的问题，首先建立一个概率模型或随机过程，使它的参数等于问题的解；然后通过对模型或过程的观察或抽样试验来计算所求参数的统计特征，最后给出所求解的近似值. 而解的精确度可用估计值的标准误差来表示.

假设所要求的量 x 是随机变量 ξ 的数学期望 $E(\xi)$，那么近似确定 x 的方法是对 ξ 进行 N 次重复抽样，产生相互独立的 ξ 值的序列 ξ_1、ξ_2、…、ξ_N，并计算其算术平均值：

$$\bar{\xi}_N=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\xi_n. \tag{1.2}$$

根据柯尔莫哥罗夫(Колмогоров)加强大数定理[20]有

$$P(\lim_{N\to\infty}\bar{\xi}_N=x)=1,$$

因此，当 N 充分大时，下式

$$\bar{\xi}_N\approx E(\xi)=x$$

成立的概率等于1，亦即可以用 $\bar{\xi}_N$ 作为所求量 x 的估计值.

用 Monte Carlo 方法求解时，最简单的情况是模拟一个发生概率为 p 的随机事件 A. 考虑一个随机变量 ξ，若在一次试验中事件 A 出现，则 ξ 取值为1；若事件 A 不出现，则 ξ 取值为0. 令 $q=1-p$，那么随机变量 ξ 的数学期望 $E(\xi)=1\cdot p+0\cdot q=p$，此即一次试验中事件 A 出现的概率. ξ 的方差 $E(\xi-E(\xi))^2=p-p^2=pq$. 假设在 N 次试验中

事件 A 出现 ν 次，那么观察频数 ν 也是一个随机变量，其数学期望 $E(\nu)=Np$，方差 $\sigma^2(\nu)=Npq$．令 $\bar{p}=\nu/N$，表示观察频率，那么按照加强大数定理，当 N 充分大时，下式

$$\bar{p}=\frac{\nu}{N}\approx E(\xi)=p \tag{1.3}$$

成立的概率等于1．因此，由上述模型得到的频率 $\bar{p}=\nu/N$ 近似地等于所求量 p．这就说明了频率收敛于概率，而且可用样本方差

$$\sigma^2(\bar{p})=\frac{\bar{p}(1-\bar{p})}{N-1} \tag{1.4}$$

作为理论方差 $\sigma^2(p)$ 的估计值[27]．

Monte Carlo 方法可以解决各种类型的问题，但总的来说，视其是否涉及随机过程的性态和结果，用 Monte Carlo 方法处理的问题可以分为两类：

第一类是确定性的数学问题．用 Monte Carlo 方法求解这类问题的方法是，首先建立一个与所求解有关的概率模型，使所求的解就是我们所建立模型的概率分布或数学期望；然后对这个模型进行随机抽样观察，即产生随机变量；最后用其算术平均值作为所求解的近似估计值．计算多重积分、求逆矩阵、解线性代数方程组、解积分方程、解某些偏微分方程边值问题和计算微分算子的特征值[14~18]等都属于这一类．

第二类是随机性问题．例如中子在介质中的扩散等问题[22,23]就属于随机性问题，这是因为中子在介质内部不仅受到某些确定性的影响，而且更多的是受到随机性的影响．对于这类问题，虽然有时可表示为多重积分或某些函数方程，并进而可考虑用随机抽样方法求解，然而一般情况下都不采用这种间接模拟方法，而是采用直接模拟方法，即根据实际物